



《材料科学基础》  
考点与考题精讲系列

第2讲 晶体结构

主讲人：王 准

网学天地  
[www.e-studysky.com](http://www.e-studysky.com)

## 1. 点阵部分（记忆）

- （1）点阵与晶体结构的关系（重点记忆）
- （2）七大晶系及点阵常数间的关系
- （3）十四种布拉维格子

## 2. 米勒指数部分（会画，会算）

- （1）晶向，晶面，晶带等

## 3. 金属单质的晶体结构

- （1）分类（记忆）
- （2）点阵常数与原子半径
- （3）晶胞中原子数（计算）
- （4）配位数和致密度（计算）
- （5）晶体原子堆垛方式（计算）
- （6）间隙（计算，会画）

## 晶体与非晶体的最本质差别

### 晶体（记忆）

原子（或分子，离子）在三维空间呈周期性重复排列，即存在长程有序。

（1）固定熔点；（2）各向异性。

### 非晶体（理解）

这些质点是无规则的堆积在一起的。

（1）无固定熔点；（2）各向同性。

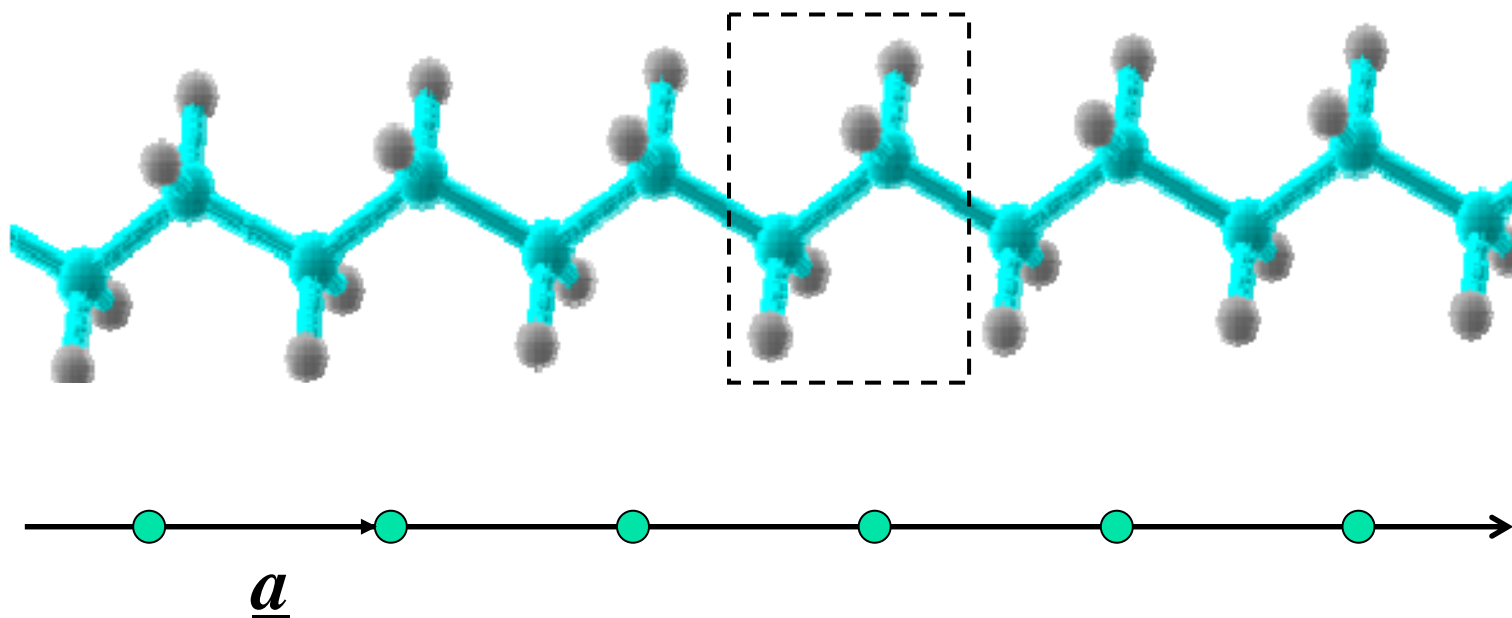
## 一、空间点阵、晶胞、晶系

### 1. 阵点、点阵、晶胞（记忆）

**阵点：**对于周期性排列的重复单位，可以抽象出没有大小、没有质量、不可分辨的点，这些点就是阵点。阵点的具体内容称为**结构基元**。

**空间点阵：**这些阵点在三维空间呈周期性规则排列并具有**完全相同的周围环境**的阵列称为空间点阵，简称点阵。

**晶胞：**具有代表性的基本单元（最小平行六面体）作为点阵的组成单元，称为晶胞。将晶胞作三维的重复堆砌就构成了空间点阵。



## 真题精讲

### 1. (08, 10, 11年) 空间点阵与晶体结构的区别和联系。

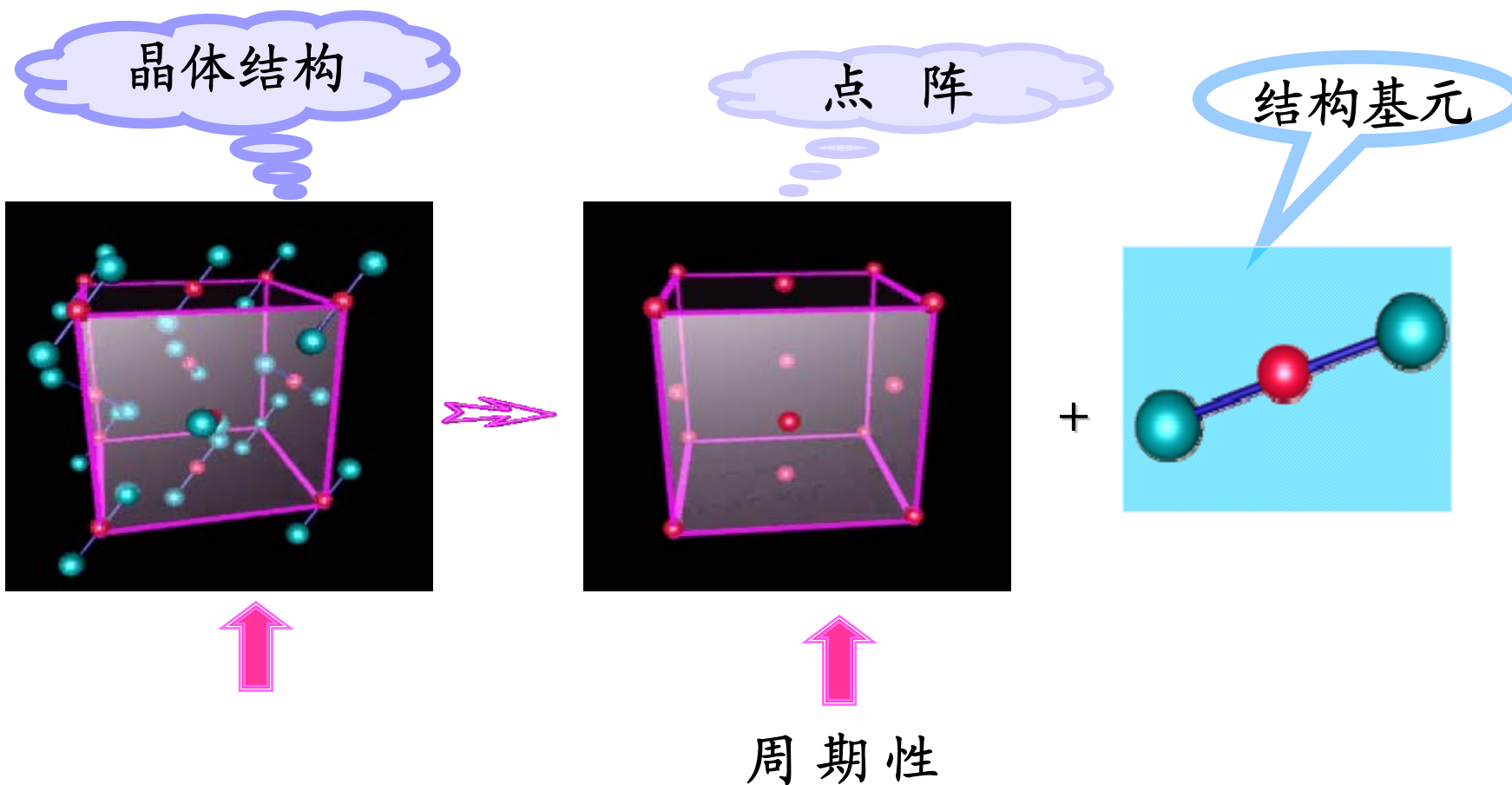
答：空间点阵是指几何点在三维空间作周期性规则排列所形成的三维阵列，是人对晶体结构的几何抽象；晶体结构即将空间点阵中的几何点换位原子、分子、分子团等具体物质的阵点。

两者的不同之处在于空间点阵中每一个阵点的周围环境都是一样的，因此只有14种可能，而对不同的晶体，由于不同位置上的原子周围环境不同，有无限种可能的晶体结构。

两者的具体联系可以表示为：晶体结构=空间点阵+基元。



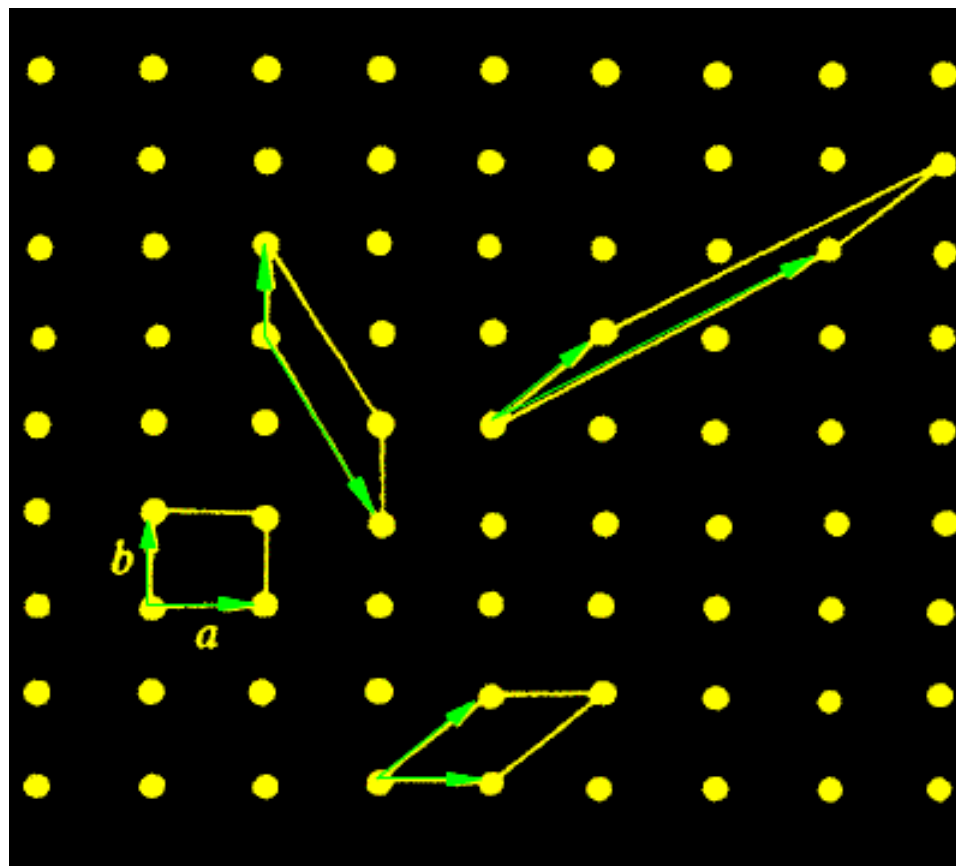
## 2. 点阵和晶体结构的关系



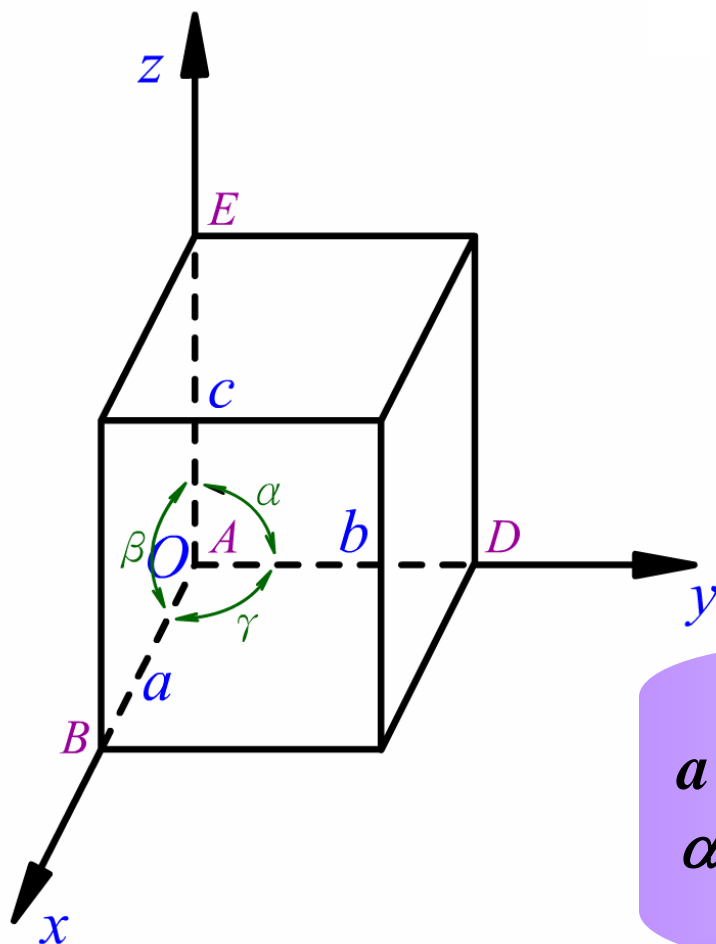
### 3. 晶胞选取的原则 (运用)

同一空间点阵可因选取方式不同而得到不相同的晶胞。

- (1) 选取的平行六面体应反映出点阵的最高对称性;
- (2) 平行六面体内的棱和角相等的数目应最多;
- (3) 当平行六面体的棱边夹角存在直角时, 直角数目应最多;
- (4) 当满足上述条件的情况下, 晶胞应具有最小的体积。







晶胞

晶胞参数

$a$ 、 $b$ 、 $c$ ：确定晶胞大小  
 $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$ ：确定晶胞形状

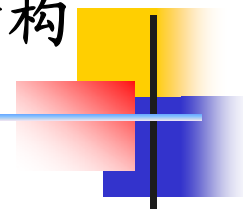
## 真题解析

1. (2011)从下面所示A和B原子排列示意图抽象出其二维空间点阵，并选取出最具有代表性的晶胞，写出其计量成分式（或分子式）（注：假设A，B原子半径相等，相邻原子之间相切）

ABABABABABABABAB  
BABABABABABABABA  
ABABABABABABABAB  
BABABABABABABABA  
ABABABABABABABAB  
BABABABABABABABA  
ABABABABABABABAB

分子式：AB

补：是否为最密排结构



## 2. (2001年) 名词解释: 单胞

答: 在空间点阵中选取一个能够反映空间点阵特点的最小单元, 要求是体积最小、对称度最高的平行六面体。

(单胞包括简单单胞和复合单胞两种, 若单胞中只有顶点有阵点, 也就是整个单胞只有一个原子, 则是简单单胞; 若出了八个顶点, 其他位置还有阵点则是复合单胞)。

## 4. 七大晶系和十四种空间点阵（熟记）

### (1) 七大晶系

- ① 三斜晶系:  $a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$
- ② 单斜晶系:  $a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
- ③ 正交晶系:  $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- ④ 四方晶系:  $a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- ⑤ 立方晶系:  $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- ⑥ 六方晶系:  $a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
- ⑦ 菱方晶系:  $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$

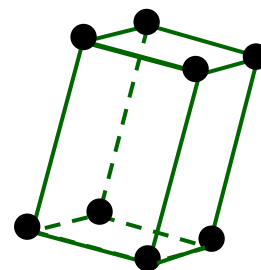


## (2) 十四种空间点阵

### ① 三斜晶系:

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma$$

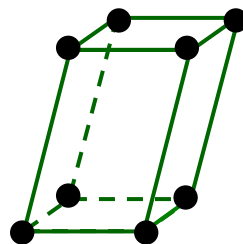


简单三斜(1)

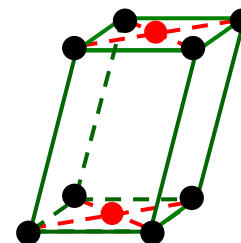
### ② 单斜晶系:

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$$



简单单斜(2)

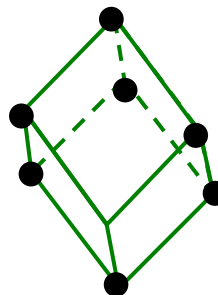


底心单斜(3)

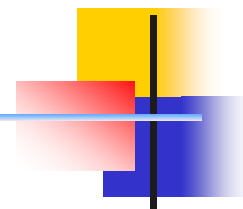
### ③ 菱方晶系:

$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ < 120^\circ$$



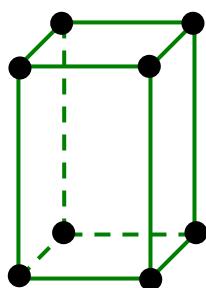
三角(4)



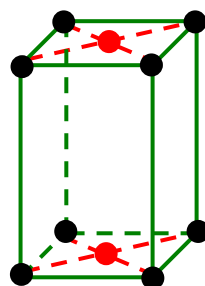


④四方晶系:

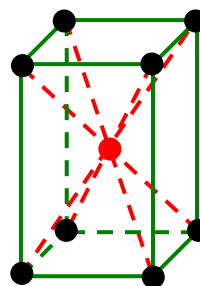
$$a = b \neq c, \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



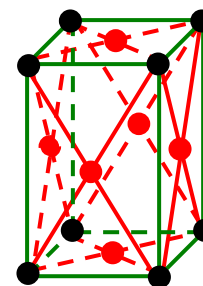
简单正交(5)



底心正交(6)



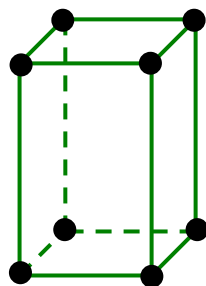
体心正交(7)



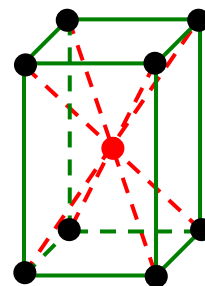
面心正交(8)

⑤正交晶系:

$$a \neq b \neq c, \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



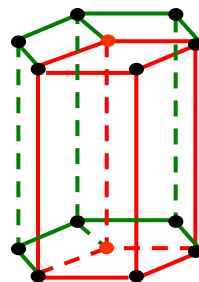
简单四方(9)



体心四方(10)

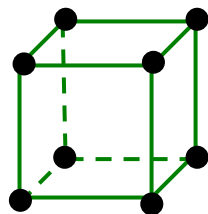


⑥ 六方晶系:  $a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$

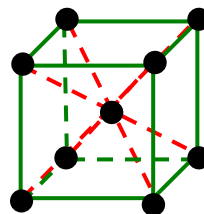


六方(11)

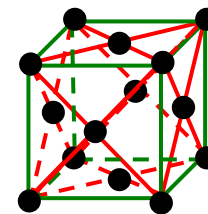
⑦ 立方晶系:  $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



简单立方(12)



体心立方(13)



面心立方(14)

## 二、晶向指数和晶面指数（运用）

晶向：晶体中原子列 的方向。

晶面：原子构成的平面。

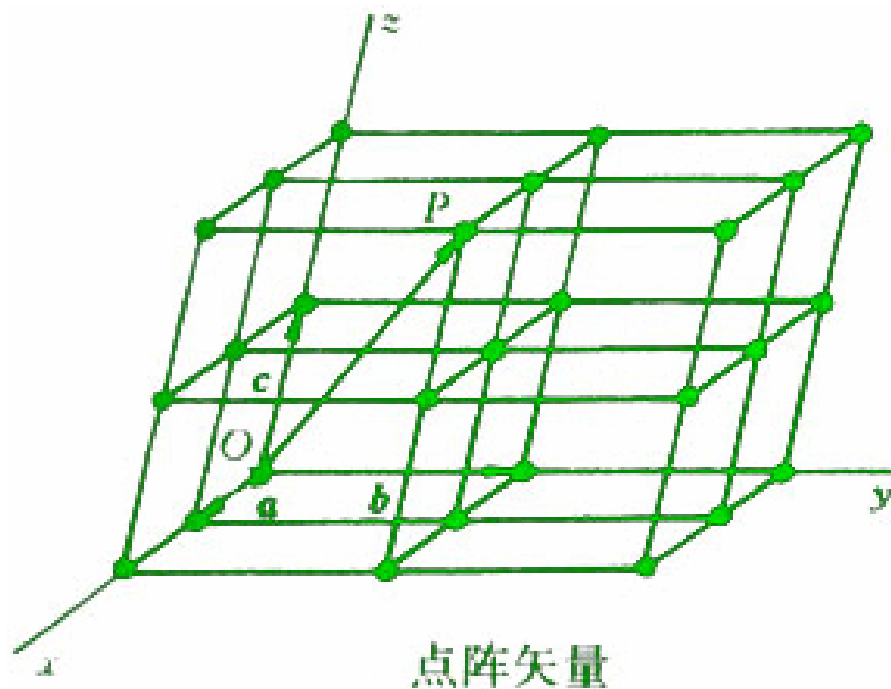
Miller（密勒）指数统一标定晶向指数和晶面指数。

### 1. 晶向指数

任意阵点 $P$ 的位置可以用矢量或者坐标来表示。

$$\vec{OP} = u \vec{a} + v \vec{b} + w \vec{c}$$

晶向指数： $[uvw]$





## (1) 晶向指数的确定步骤

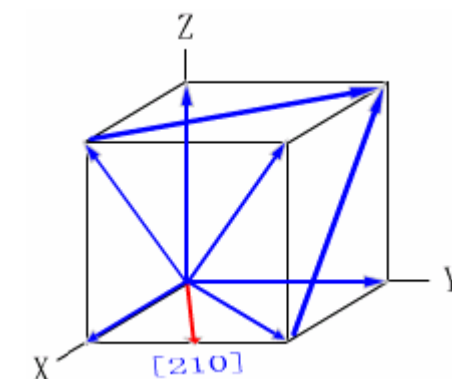
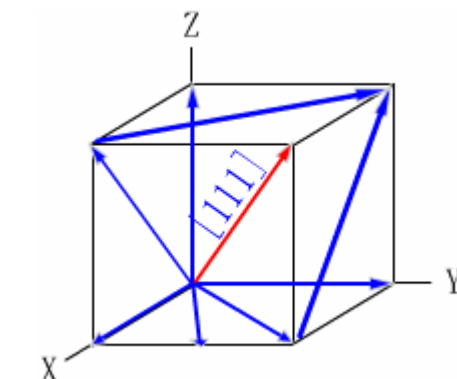
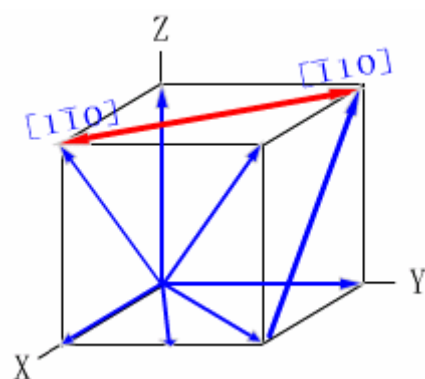
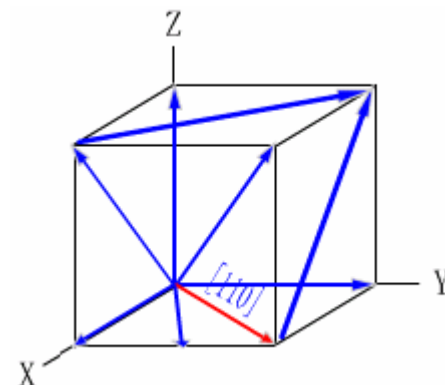
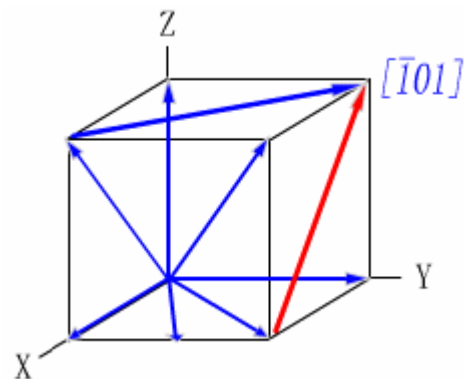
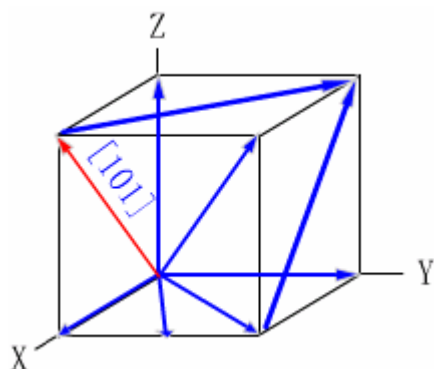
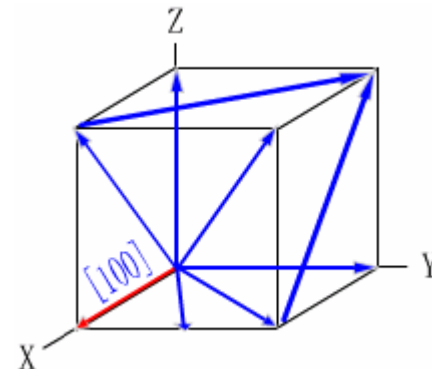
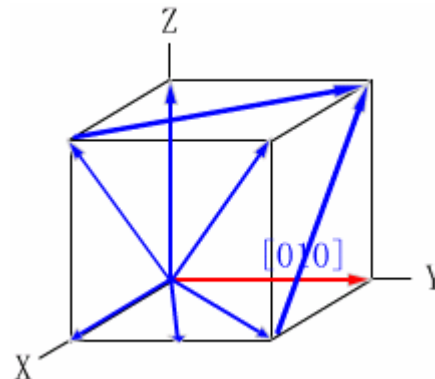
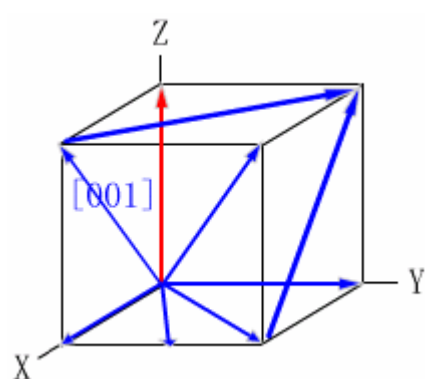
- ①以晶胞的某一阵点 $O$ 为原点，过原点 $O$ 的晶轴为坐标轴 $x$ 、 $y$ 、 $z$ ，以晶胞点阵矢量的长度作为坐标轴的长度单位。
- ②过原点 $O$ 作一直线 $OP$ ，使其平行于待定晶向。（将待定晶向平移过来）
- ③在直线 $OP$ 上选取距原点 $O$ 最近的一个阵点 $P$ ，确定 $P$ 点的3个坐标值。
- ④将这3个坐标值化为最小整数 $u$ 、 $v$ 、 $w$ ，加以方括号， $[uvw]$ 即为待定晶向的晶向指数。

（理解，会用来做题，可能会出一道题目）



## (2) 晶向指数的例子

正交晶系一些重要晶向的晶向指数  
(最好有一个大致的印象)



### (3) 晶向指数的意义

晶向指数表示着所有相互平行、方向一致的晶向；所指方向相反，则晶向指数的数字相同，但符号相反；晶体中因对称关系而等同的各组晶向可归并为一个晶向族，用 $\langle u \ v \ w \rangle$ 表示。

(晶向族可能会出题目)

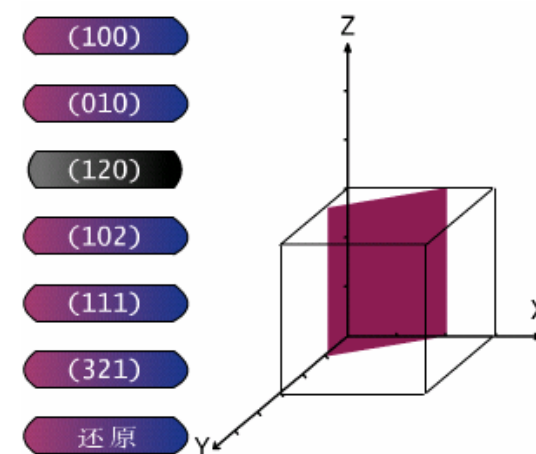
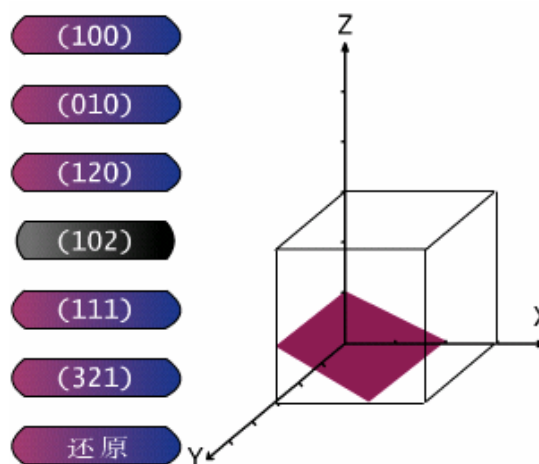
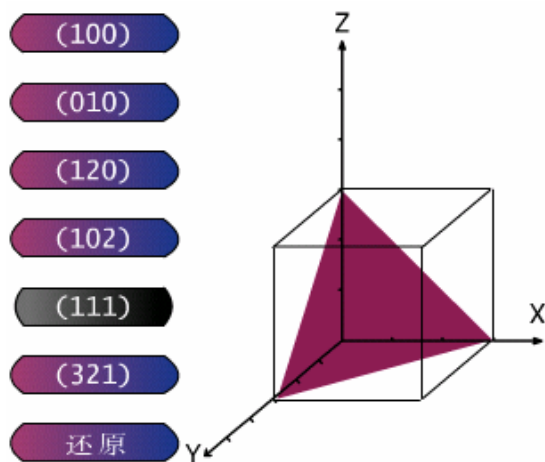
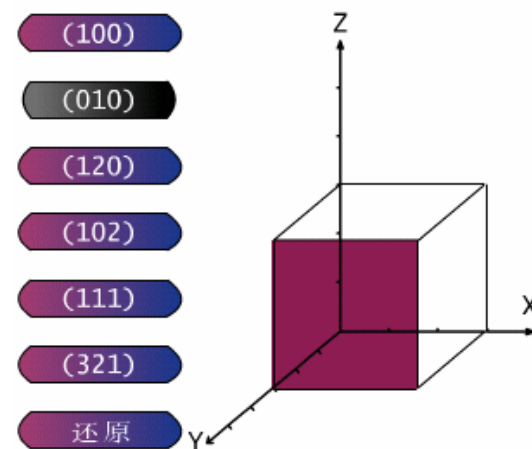
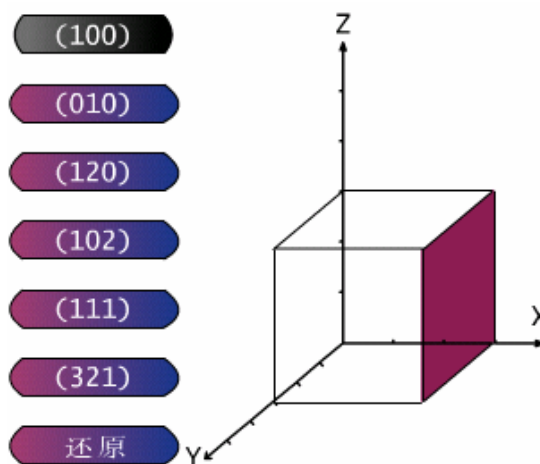
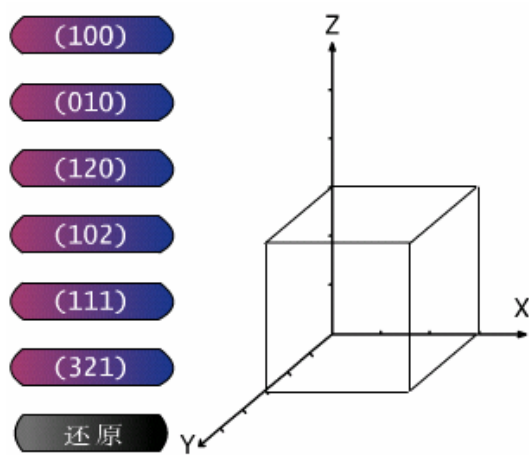
## 2. 晶面指数

### (1) 晶面指数标定步骤

- ① 在点阵中设定参考坐标系，设置方法与确定晶向指数时相同；
- ② 求得待定晶面在三个晶轴上的**截距**，若该晶面与某轴平行，则在此轴上截距为无穷大；若该晶面与某轴负方向相截，则在此轴上截距为一负值；
- ③ 取各截距的**倒数**；
- ④ 将三倒数化为**互质**的整数比，并加上圆括号，即表示该晶面的指数，记为 $(hkl)$ 。

(注：对于过原点的晶面，应平移平面)

## (2) 晶面指数的例子



### (3) 晶面指数的意义

晶面指数所代表的不仅是某一晶面，而是代表着 一组相互平行的晶面。

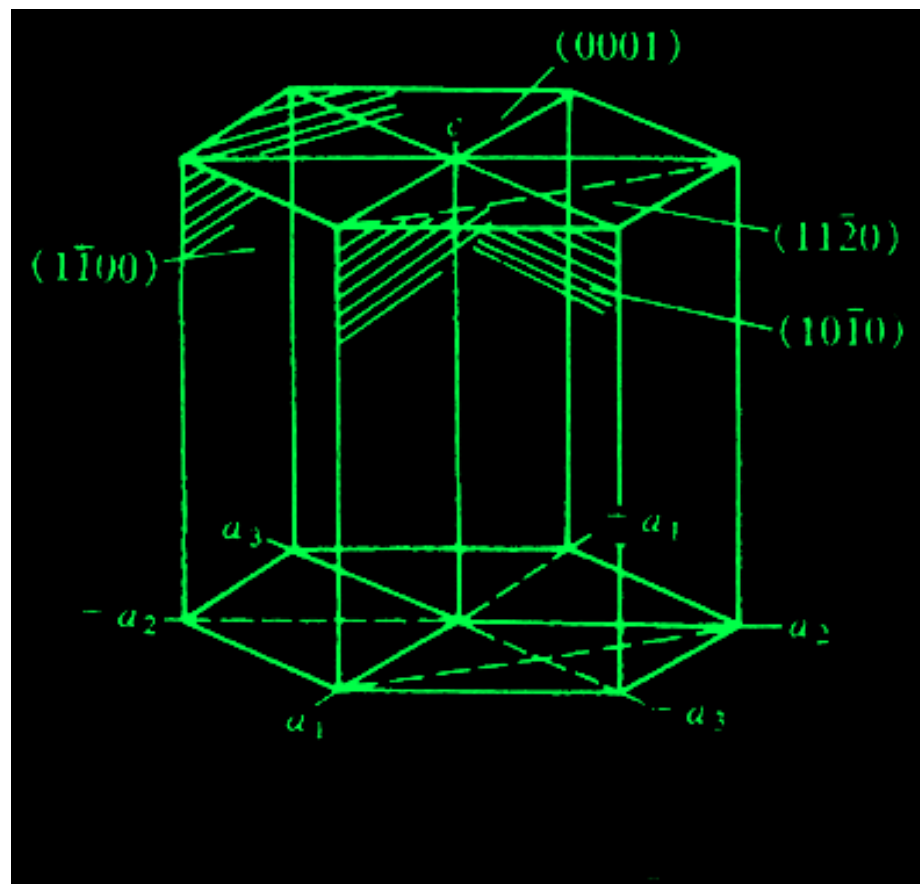
在晶体内凡晶面间距和晶面上原子的分布完全相同，只是空间位向不同的晶面可以归并为同一晶面族，以 $\{hkl\}$ 表示，它代表由对称性相联系的若干组等效晶面的总和。

(不要把晶面和晶向的括号给弄反了)



### 3. 六方晶系指数

六方晶系的晶向指数和晶面指数同样可以应用上述方法标定，这时取 $a_1$ ， $a_2$ ， $c$ 为晶轴，而 $a_1$ 轴与 $a_2$ 轴的夹角为120度， $c$ 轴与 $a_1$ ， $a_2$ 轴相垂直。但这种方法标定的晶面指数和晶向指数，不能显示六方晶系的对称性，同类型晶面和晶向，其指数却不雷同，往往看不出他们的等同关系。



## (1) 六方晶系晶面指数标定

根据六方晶系的对称特点，对六方晶系采用 $a_1$ ， $a_2$ ， $a_3$ 及 $c$ 四个晶轴， $a_1$ ， $a_2$ ， $a_3$ 之间的夹角均为120度，这样，其晶面指数就以 $(hkil)$ 四个指数来表示。

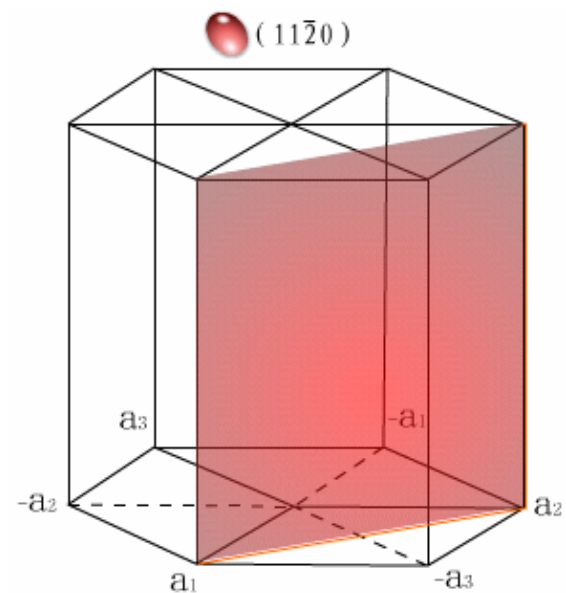
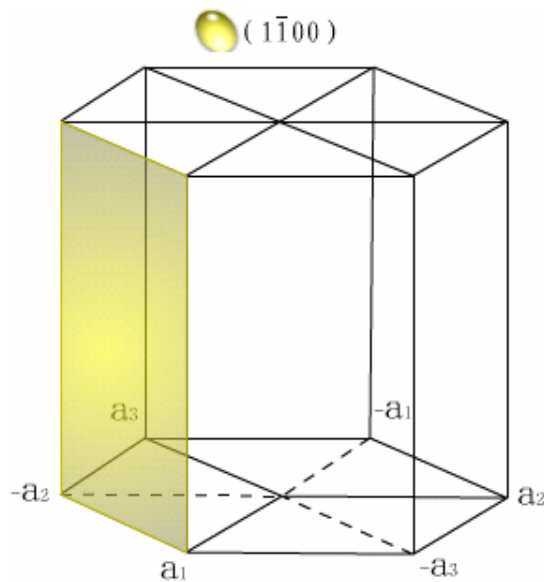
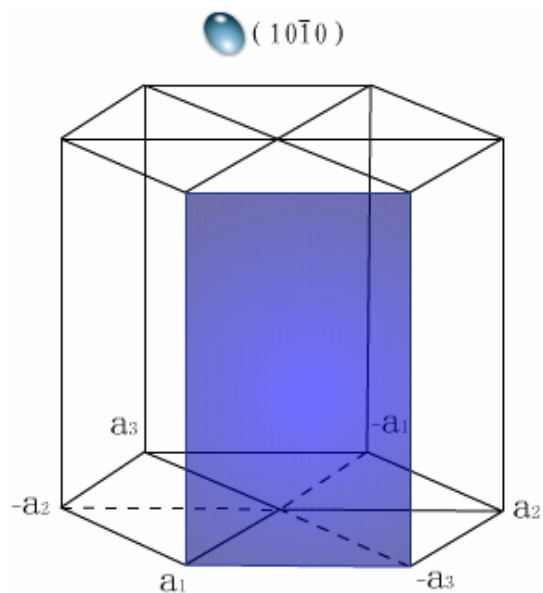
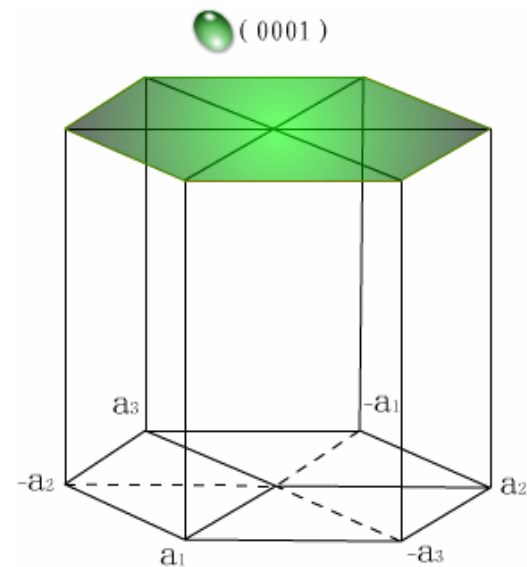
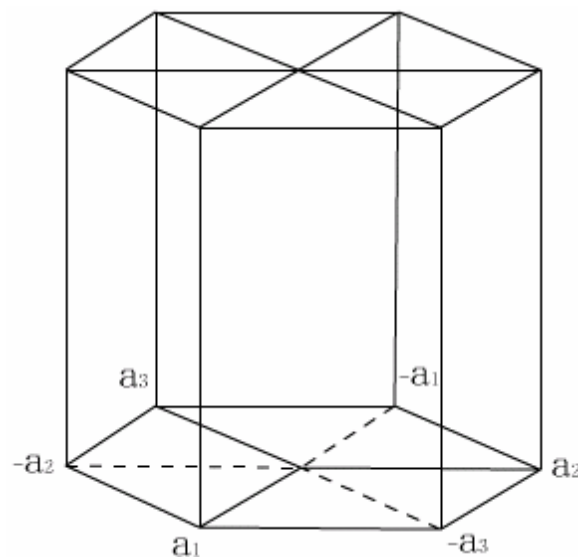
根据几何学可知，三维空间独立的坐标轴最多不超过三个。前三个指数中只有两个是独立的，它们之间存在以下关系：

$$i = -(h+k)。$$

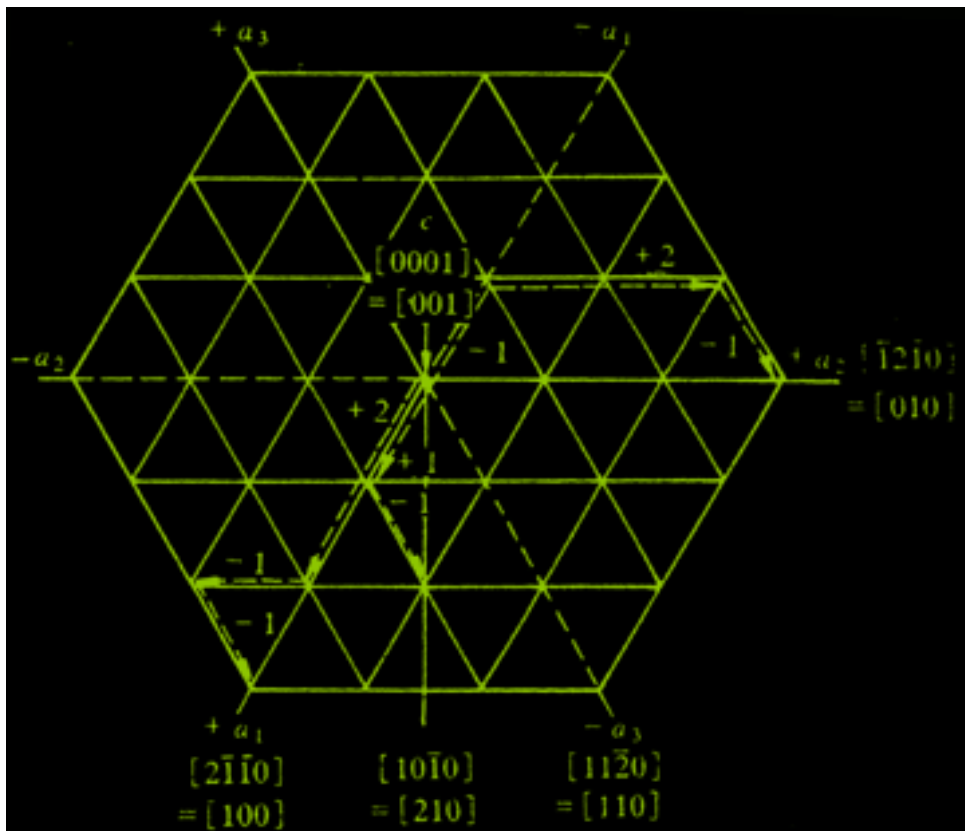




## (2) 六方晶系一些晶面的指数



采用4轴坐标时，晶向指数的确定原则仍同前述晶向指数可用  $\{uv tw\}$  来表示，这里  $u+v = -t$ 。



## 六方晶系晶向指数的表示方法 ( $c$ 轴与图面垂直)

网学天地 (www.e-studysky.com) 版权所有

## (4) 六方晶系中，三轴指数和四轴指数的相互转化

三轴晶向指数( $UVW$ )      四轴晶向指数( $uvw$ )

$$\begin{cases} U = u - t, & V = v - t, & W = w \\ u = \frac{1}{3}(2U - V), & v = \frac{1}{3}(2V - U), & t = -(u + v), & w = W \end{cases}$$

三轴晶面指数( $hkl$ )      四轴晶面指数( $hkil$ )

$$i = - (h + k)$$



## 4. 晶帶

所有平行于或相交于同一直线的这些晶面构成一个晶轴，此直线称为晶带轴。属此晶带的晶面称为晶带面。

晶带轴 $[uvw]$ 与该晶带的晶面 $(hkl)$ 之间存在以下关系：

$$hu + kv + lw = 0$$

凡满足此关系的晶面都属于以 $[uvw]$ 为晶带轴的晶带，故此关系式也称作晶带定律。

## 晶帶定律的应用 (1)

晶面1 ( $h_1k_1l_1$ )  
 晶面2 ( $h_2k_2l_2$ )

晶帶軸 ( $uvw$ )

$$u:v:w = \left| \begin{array}{cc} k_1 & l_1 \\ k_2 & l_2 \end{array} \right| : \left| \begin{array}{cc} l_1 & h_1 \\ l_2 & h_2 \end{array} \right| : \left| \begin{array}{cc} h_1 & k_1 \\ h_2 & k_2 \end{array} \right|$$

$$\begin{vmatrix} u & v & w \\ h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \end{vmatrix}$$

## 晶帶定律的应用 (2)

晶向1 ( $u_1v_1w_1$ )

晶面 ( $hkl$ )

晶向2 ( $u_2v_2w_2$ )

$$h:k:l = \left| \begin{array}{cc} v_1 & w_1 \\ v_2 & w_2 \end{array} \right| : \left| \begin{array}{cc} w_1 & u_1 \\ w_2 & u_2 \end{array} \right| : \left| \begin{array}{cc} u_1 & v_1 \\ u_2 & v_2 \end{array} \right|$$

$$\begin{vmatrix} h & k & l \\ u_1 & v_1 & w_1 \\ u_2 & v_2 & w_2 \end{vmatrix}$$

## 晶帶定律的应用 (3)

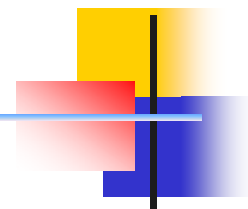
晶轴1 ( $u_1v_1w_1$ )      晶轴2 ( $u_2v_2w_2$ )      晶轴3 ( $u_3v_3w_3$ )

若  $\begin{bmatrix} u_1 & v_1 & w_1 \\ u_2 & v_2 & w_2 \\ u_3 & v_3 & w_3 \end{bmatrix} = 0$  , 则三个晶轴同在一个晶面上。

## 晶帶定律的应用 (4)

晶面1 ( $h_1k_1l_1$ )      晶面2 ( $h_2k_2l_2$ )      晶面3 ( $h_3k_3l_3$ )

若  $\begin{bmatrix} h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \\ h_3 & k_3 & l_3 \end{bmatrix} = 0$  , 则三个晶面同属一个晶帶。

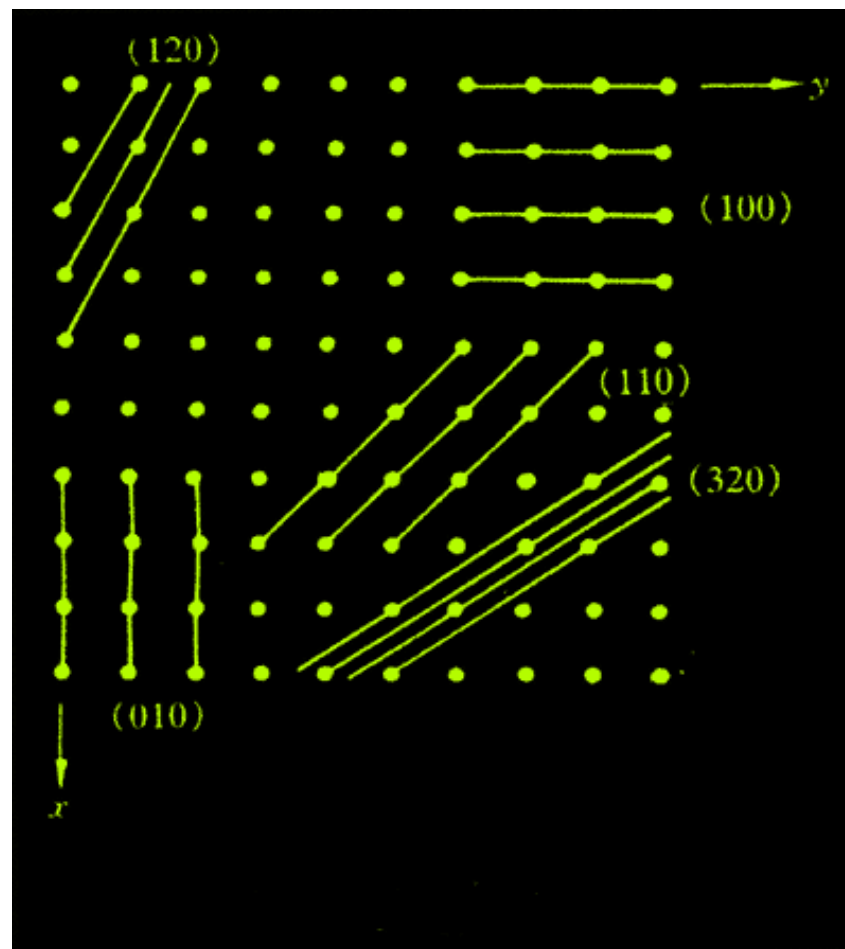


## 5. 晶面间距 (1)

晶面指数确定了晶面的位向和间距。

由晶面指数求面间距 $d_{hkl}$ 。

通常，低指数的面间距较大，  
而高指数的晶面间距则较小。  
晶面间距愈大，该晶面上的原子排列愈密集；  
晶面间距愈小，该晶面上的原子排列愈稀疏。



## 晶面间距 (2)

正交晶系:

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2}}$$

立方晶系:

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

六方晶系:

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{4}{3} \left( \frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} \right) + \left( \frac{l}{c} \right)^2}}$$



## 晶面间距 (3)

复杂晶胞  $\xrightarrow{\text{修正}}$  附加面  $D_{hkl}/2$

体心立方

$$h + k + l = \text{奇数}$$

面心立方

$h k l$  不全为奇数或者不全为偶数

密排六方

$$h + 2k = 3n \ (n=1,2,3....), \text{且 } l \text{ 为奇数}$$



## 真题解析

1. (2003年, 简答, 画图) 什么是点阵参数? 正方晶系和立方晶系的点阵特征, 画出立方晶系中  $(12\bar{3})$  面。

答: 点阵参数是描述点阵单胞几何形状的基本参数, 由六个参数组成: 三条边长  $a$ 、 $b$ 、 $c$  和三个轴之间的夹角  $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$ 。

正方晶系:  $a=b \neq c$ ,  $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$

立方晶系:  $a=b=c$ ,  $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$

2. (2005年, 简答) 什么是晶面族?  $\{111\}$ 晶面族包括哪些晶面?

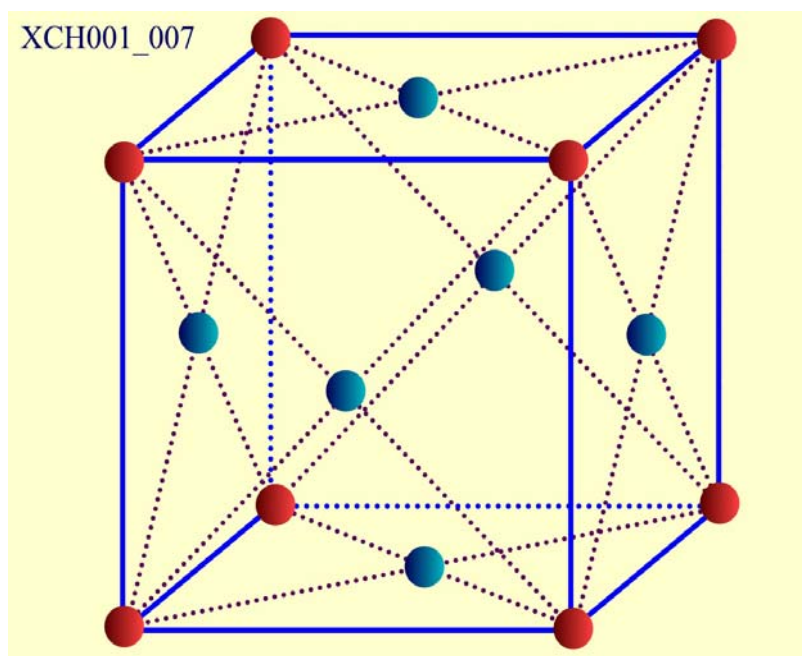
答: 晶体中原子或分子排列相同的晶面组合称为晶面族  
 $\{111\}$ 晶面族包括 $(111)$ 、 $(11\bar{1})$ 、 $(1\bar{1}1)$ 、 $(\bar{1}11)$

3. (2005年, 简答, 画图) 面心立方[100]和[111]晶向夹角? {100}晶面间距?

答: 两个向量的夹角公式

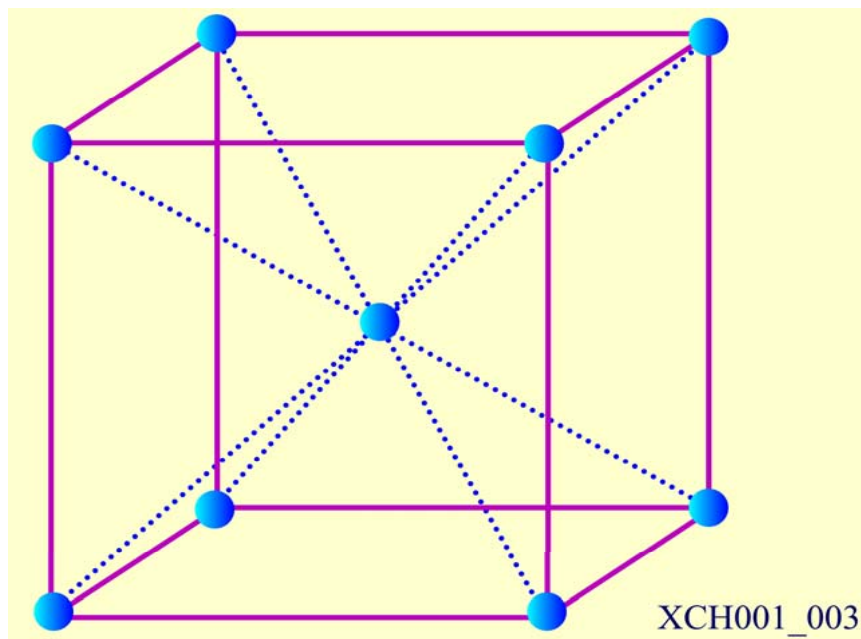
## 三、典型晶体结构

### 1. 分类



A1 FCC 面心立方结构

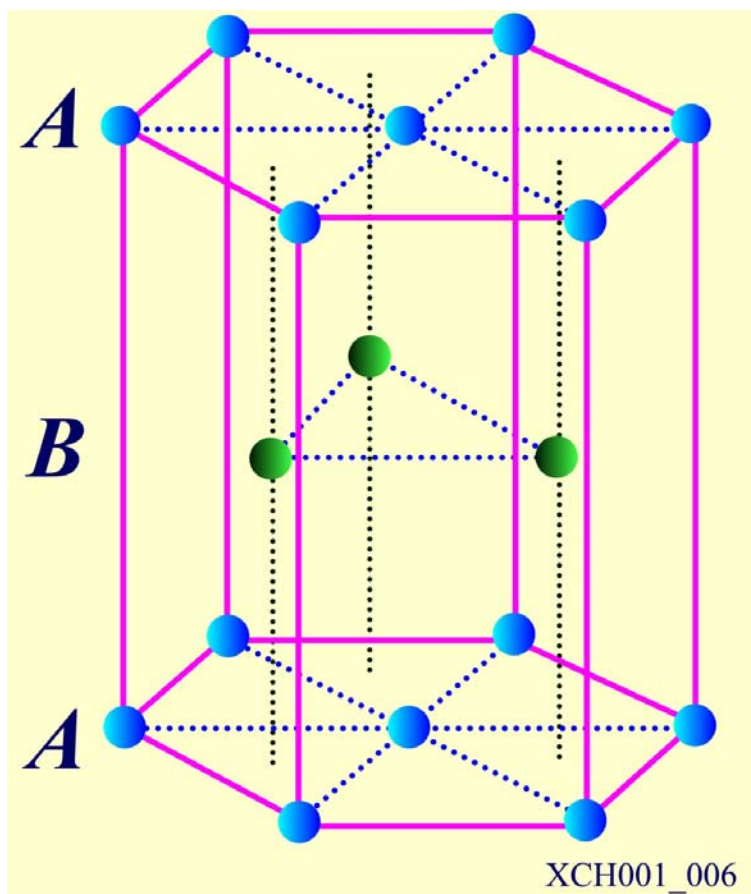
例：Cu、Ag、Au、Al



例：Cr、V、 $\alpha$ -Fe

A2 BCC 体心立方结构





例：Be、Mg、Zn、Cd

A3 HCP 密排六方结构

## 2. 晶体结构特征参数

晶胞中的原子数 
$$N = N_i + \frac{N_f}{2} + \frac{N_c}{8}$$

致密度 
$$K = \frac{nv}{V} = \frac{n \frac{4}{3} \pi R^3}{V}$$

点阵常数

$a, c$

原子半径

$R$

配位数

$N$

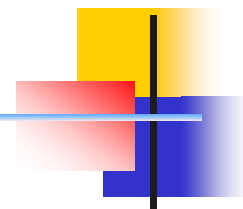
密排面

密排向

轴比

$c/a$

堆垛方式





三种典型金属结构的晶体学特点

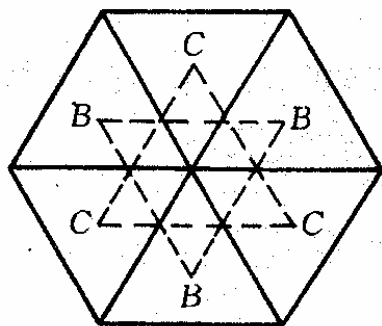
| 结构特征     |                | 晶体结构类型                |   |   |
|----------|----------------|-----------------------|---|---|
|          |                | 面心立方(A1)              | 体心立方(A2)  | 密排六方(A3)  |
| 点阵常数     |                | $a$                   | $a$   | $a, c \ (c/a=1.633)$  |
| 原子半径 $R$ |                | $\frac{\sqrt{2}}{4}a$ | $\frac{\sqrt{3}}{4}a$   | $\frac{a}{2} \left( \frac{1}{2} \sqrt{\frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{4}} \right)$ |
| 晶胞内原子数   |                | 4                     | 2   | 6   |
| 配位数      |                | 12                    | 8   | 12  |
| 致密度      |                | 0.74                  | 0.68  | 0.74  |
| 间隙       | 四面体间隙 数量<br>大小 | 8<br>$0.225R$         | 12<br>$0.291R$  | 12<br>$0.225R$  |
|          | 八面体间隙 数量<br>大小 | 4<br>$0.414R$         | 6<br>$0.154R \langle 100 \rangle$<br>$0.633R \langle 110 \rangle$ | 6<br>$0.414R$   |

## 堆垛

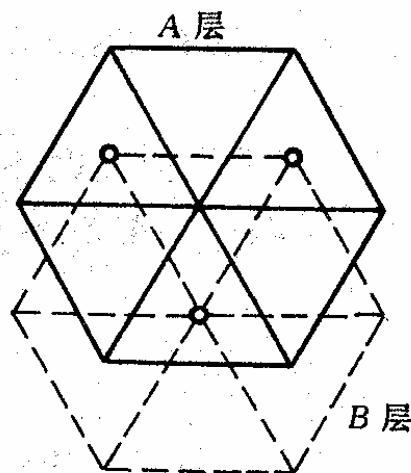
**fcc**  
**hcp**

最密排面  
 $\{111\}$   
 $\{0001\}$

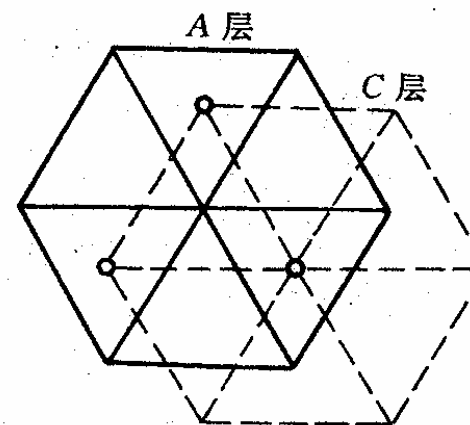
密排结构  
**ABCABCABC.....**  
**ABABABAB.....**



(a)

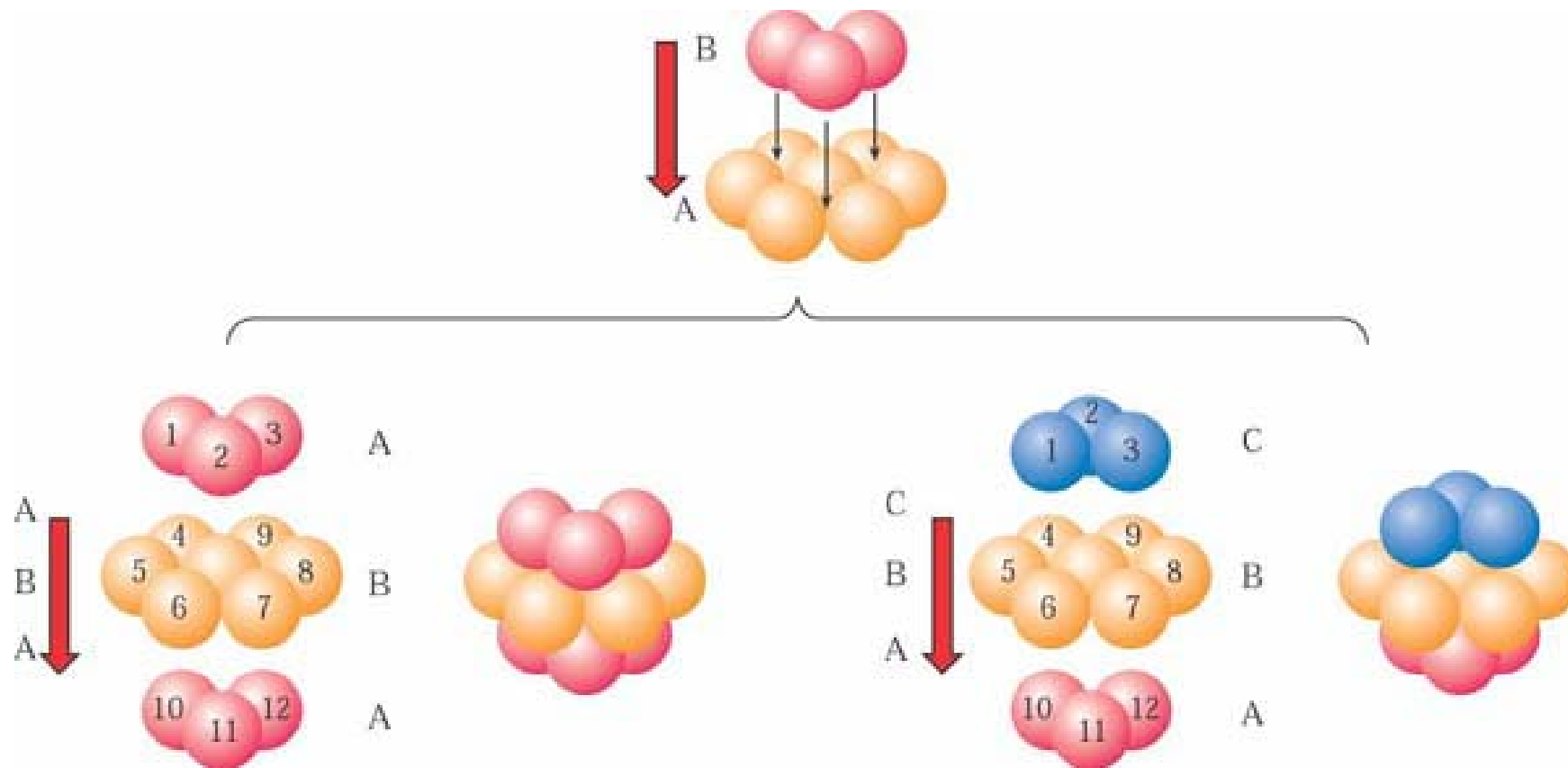


(b)



(c)

面心立方和密排六方点阵中密排面的分析



配位数为12，空间利用率进一步增大，为最紧密堆积

## 真题解析

1. (2005年, 简答) fcc和hcp中原子堆垛方式和致密度是否有差异? 加以说明。

答: fcc是ABCABC堆垛方式; hcp是ABAB堆垛方式。

由于都是最密排列, 所以致密度相同都是74%, 配位数都是12 (可以加入致密度计算)

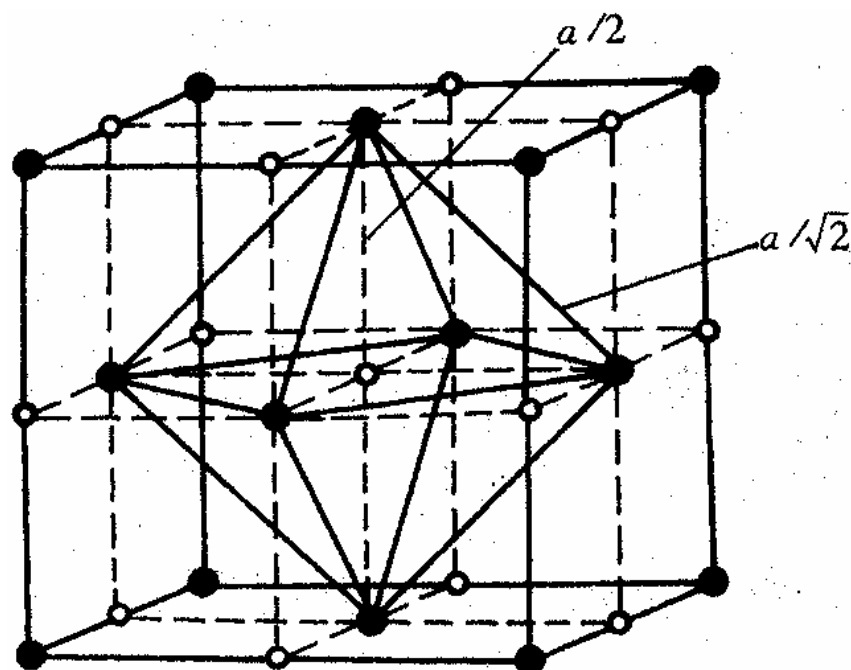
2. (2006年, 简答, 画图) 在体心立方晶胞中画出一个最密排方向, 并标明晶向指数, 再画出过该方向的两个不同低指数晶面, 写出对应晶面指数, 这两个晶面与晶向构成什么关系?

注意事项:

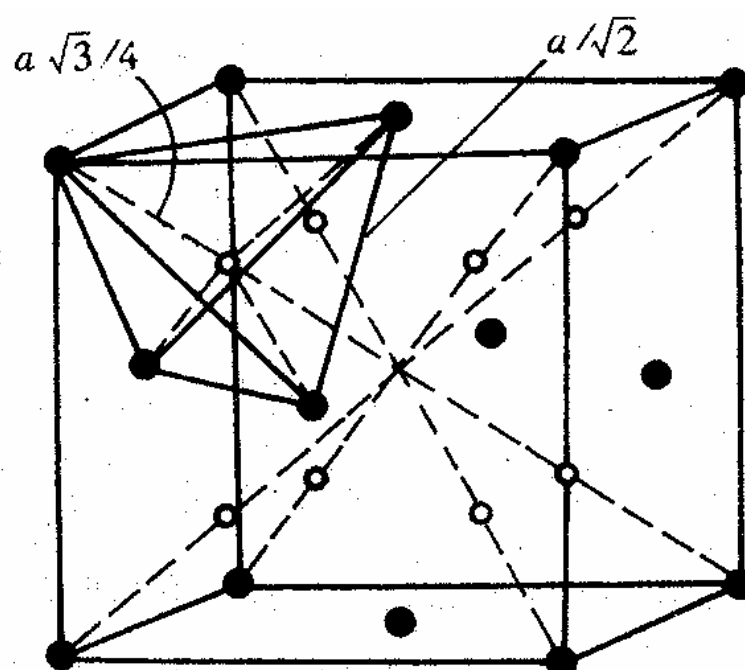
1. 画图规范
2. 选取的技巧
3. 尽量写出晶带定律

### 3. 间隙

fcc, hcp 间隙为正多面体, 且八面体和四面体间隙相互独立  
bcc 间隙不是正多面体, 四面体间隙包含于八面体间隙之中

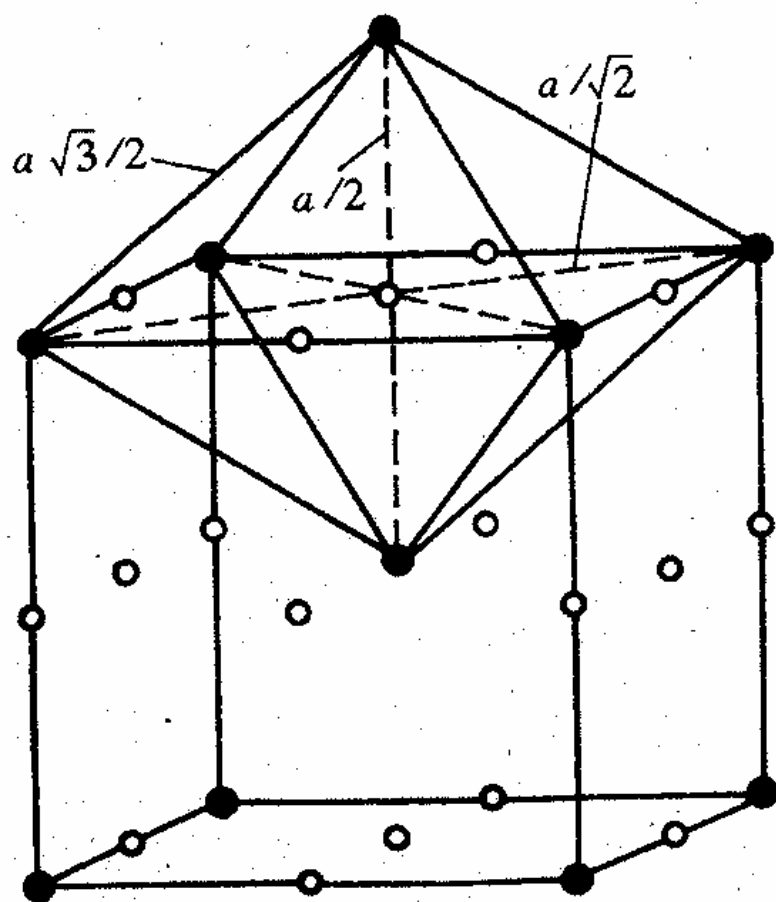


● 金属原子  
○ 八面体间隙

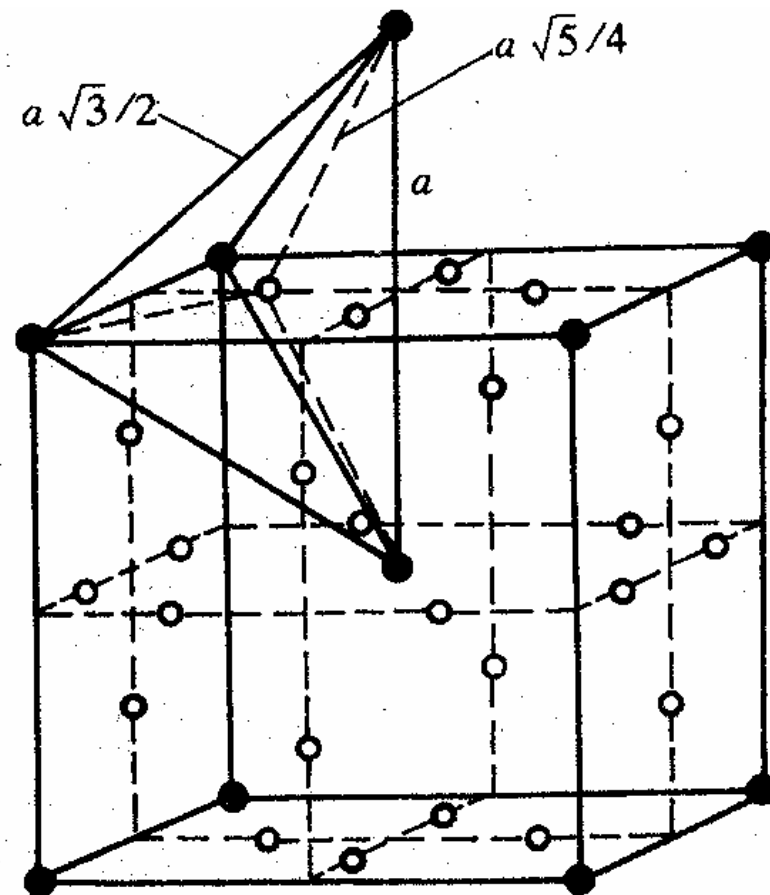


● 金属原子  
○ 四面体间隙

面心立方点阵中的间隙

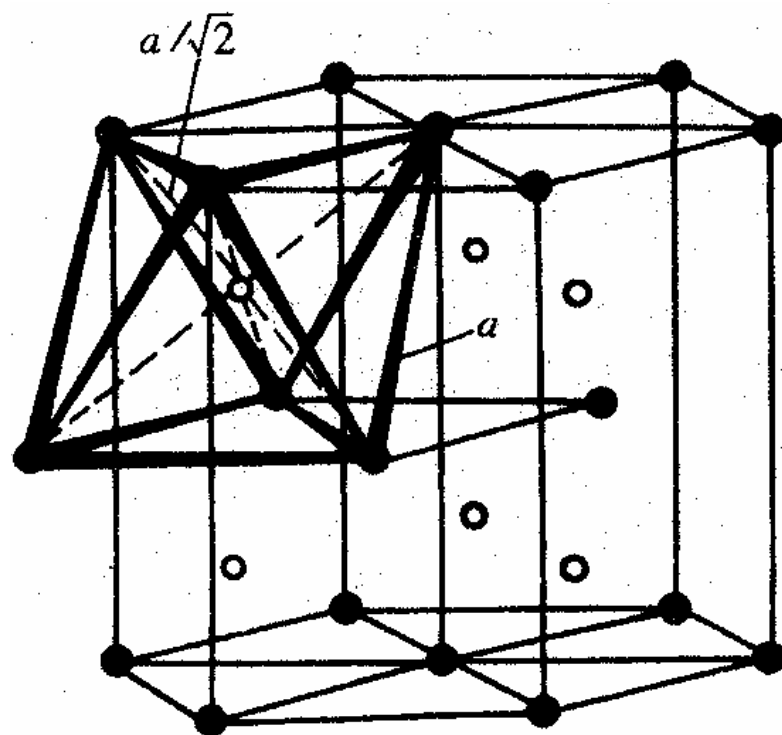


- 金属原子
- 八面体间隙

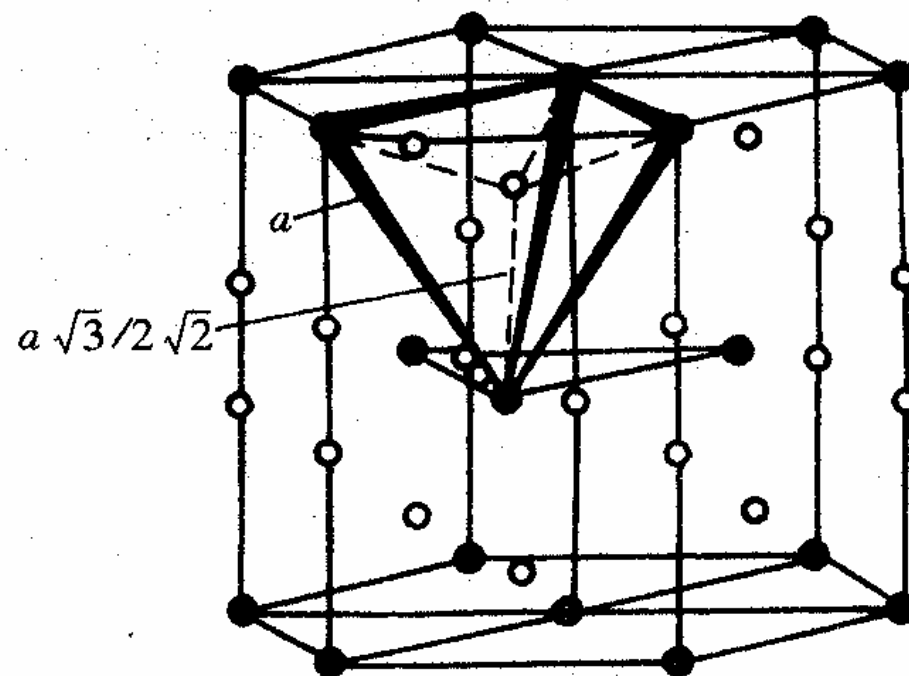


- 金属原子
- 四面体间隙

体心立方点阵中的间隙



- 金属原子
- 八面体间隙



- 金属原子
- 四面体间隙

密排六方点阵中的间隙



## 真题解析

1. (2006年, 简答) 以fcc为例, 描述晶体结构特征的常用参数有哪些? (区别于点阵参数)

答: 面心立方, 一个晶胞中有四个原子, 密排面是 $\{111\}$ , 密排方向 $\langle 110 \rangle$ , 配位数12, 致密度74%, 原子半径, 堆垛顺序ABCABC, 四面体间隙8个, 八面体间隙4个。

2. (2008年, 画图) 分别画出点阵常数为 $a$ , 具有A2晶体结构金属的八面体间隙、四面体间隙及(110)面上的原子排列情况。

谢谢!